ランダム磁性体の統計物理(第48回物性若手夏の学校(2003年度),講義ノート)

福島, 孝治

ランダム磁性体の統計物理

東京大学大学院総合文化研究科 福島孝治[1]

このサブゼミでは,ランダム磁性体の基本的なところからはじめて,レプリカ法に代表されるような乱れの一般的な取り扱いについて議論していきたい.

1 磁性体の相転移

磁性体の物理現象は,磁性原子のスピン集団の協力現象として説明される.その統計力学的な最も簡単なモデル・ハミルトニアンは,次のようなイジング模型

$$\mathcal{H}(\{S_i\}|\{J_{ij}\},\{h_i\}) = -\sum_{\langle ij\rangle}^{N} J_{ij}S_iS_j - \sum_{i}^{N} h_iS_i \tag{1}$$

である.ここで,S_i は i で特徴付けられる位置にあるスピン変数で,±1 の値をとるとする.スピンの総数は N とする.J_{ij} は,2つのスピンに働く相互作用であり,h_i は各スピンに作用する外部磁場である.まず,ランダムな磁性体を議論する前に均一なきれいな系を見ておく.そのためには,スピン変数が置かれている位置を決める必要があるが,本解説では3次元立方格子などのきれいな格子構造を考えることにする[2].

その格子上にスピン模型の相互作用 J_{ij} が格子間の距離 r_{ij} だけで決まる正の同じ値 J をとる場合に,この模型は強磁性体,負の値の場合は反強磁性体である.同様に磁場 h_i も格子位置 i に依存せずに一定値 h とする.Weissに代表されるような平均場理論によって,このような均一磁性体模型は秩序-無秩序転移を示すことがわかる.すなわち,この模型は,温度を下げるとある転移温度以下で秩序(この問題では自発磁化)が出現することを表現している.具体的に,自発磁化

$$M(T) = \lim_{h\to0}\lim_{N\to\infty}\left\langle \frac{1}{N}\sum_{i}^{N} S_i\right\rangle_T = \lim_{h\to0}\lim_{N\to\infty}\frac{\mathrm{Tr}\ S_i e^{-\mathcal{H}/k_BT}}{\mathrm{Tr}\ e^{-\mathcal{H}/k_BT}}, \tag{2}$$

がこの相転移の秩序変数となる.ここで,k_B はボルツマン定数であり,$\langle\cdots\rangle_T$ は模型(1)に対する温度 T での熱平均を表す.

さらに,転移温度近傍に見られる比熱や帯磁率の特異性を特徴付ける臨界指数は様々な模型・物質について理論的・実験的に精力的に調べられ,それらは,スケーリング理論やWilsonの繰り込み群の理論によって,幾つかの限られたグループにクラス分けできること(臨界指数の普遍性)が示された.それぞれのクラスは,空間次元,秩序変数の対称性や相互作用のレンジ等の模型の基本的な要素だけで指定できる.これは,ことを臨界現象・臨界指数に限れば,理論模型の詳細に依存しないことを意味している.つまり,それほど熱心に模型を練り尽くす必要は無く,人間の模型に対する無知さを補間してくれていると思うことができそうである.そうすれば,後は幾つのクラスがあるのか,またそれぞれの物質はどのクラスに属するか等と,ほとんど植物学のようなことしか残っていないようにも思える.

---

[1]E-mail:hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://www.phsy.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima/

[2]ここで,まず最初にランダムな磁性体が思い付く.すなわち,格子構造を持たないバラバラな位置にスピン変数を置く模型である.実際に,アモルファス合金等ではこのような状況が実現していると考えられている.しかし,ここではその問題には深入りしない.

2 ランダム磁性体入門

さて，ここでランダムな磁性体の臨界現象を考えてみることにする．先のように均一系での臨界現象の理解が進むと，現実的には避けられない「乱れ」の存在をどう考えればいいだろうか．つまり，均一系での理解が乱れの効果でどのような修正を受けるか，あるいは受けないかは，(不幸が待っていそうで) あまり調べたくないが，大事な問題であろう．「乱れ」の種類には沢山の種類があるが，一つの簡単な例として，上記の模型 (1) に格子欠陥を取り込むとすると，格子点上にスピンの有無を表す変数 $\tau_i(\in=\{0,1\})$ を導入して，相互作用を $J_{ij}=J\tau_i\tau_j$ とすればよい．ここで，$\tau_i=0$ は格子欠陥によってスピンがいなくなっていることを表す．この模型は希釈イジング模型と呼ばれている．まず，大雑把に考えて，相転移のようなマクロな現象には 1 つ 2 つの格子欠陥は影響しないと思える．少なくともオーダー N で，全格子点の $x(>0)$%の欠陥が必要であろう．逆にあまり多すぎて，スピン間の相互作用が切れ切れになってしまうと，協力現象としての相転移は起こりそうにない．この中間に考えるべき問題がある．

他の例としては，イジング模型 (1) の第 2 項にある磁場が各スピンに依存してランダムな値をとるランダム磁場模型がある．ランダムな磁場は人工的に作ることは難しいが，先の希釈反強磁性 ($J>0$) イジング模型に一様な磁場をかけることで，実質的にランダム磁場の模型になることが予想され，実験的にも幾つかの物質で調べられている [1]．この問題では大きなランダム磁場は揃おうとする秩序状態と競合する．どのくらいの磁場で秩序が壊れるかや，壊れずに残された相転移の臨界指数はどうなるかが問題となる．

2.1 レプリカ理論：結局は均一系へ

このような乱れを理論的に取り扱うために，ランダムネスがある確率分布関数に従うランダム変数だと考えることにする．希釈イジング模型の場合は，先の秩序変数 (2) は，

$$\overline{M}=\lim_{h\to 0}\lim_{N\to\infty}\int\prod_i(d\tau_i)P(\tau_i)\frac{\mathrm{Tr}\ S_i e^{-\mathcal{H}(\{S_i\}|\{\tau_i\})/k_BT}}{\mathrm{Tr}\ e^{-\mathcal{H}(\{S_i\}|\{\tau_i\})/k_BT}}, \tag{3}$$

となる．$\overline{\cdots}$ はランダム変数 τ に関する配位平均を表す．この式からわかるように，熱平均の外側にもうひとつ乱れを表すランダム変数に関する平均操作が必要になっている．この平均操作には順番が付いていることが重要である．まず，ランダム変数に依存したハミルトニアンによる熱平均を計算した後に，ランダム変数 $\{\tau\}$ に関する平均をする．統計力学によれば，このような物理量を計算するためには自由エネルギー

$$F=-T\ \overline{\log Z(T|\{\tau\})} \tag{4}$$

が計算できればよい．一般に，確率変数を含む Tr を評価することは難しいのだが，その平均操作の順序を入れ換えることを可能にするのがレプリカ法と呼ばれている技法である．その手順は恒等式

$$\overline{\log Z(T|\{\tau\})}=\overline{\lim_{n\to 0}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}Z^n(T|\{\tau\})} \tag{5}$$

を用いて，特に n を自然数とすることで，ランダム変数に関する平均操作を先にしてしまうのである．n 個の同じランダム変数を持つ系の分配関数を Z_n は

$$Z_n=\overline{Z^n(T|\{\tau\})}=\int\prod_i(d\tau_i)P(\tau_i)\mathrm{Tr}_{S^{(1)}}\mathrm{Tr}_{S^{(2)}}\cdots\mathrm{Tr}_{S^{(n)}}\exp\left(-\frac{1}{T}\sum_{\alpha=1}^{n}\mathcal{H}(S^{(\alpha)}|\{\tau\})\right) \tag{6}$$

となり，先にランダム変数について平均が容易に行える．この途中に，n 個の複製系が出来てたことが，レプリカ (複製) 法の名前の由来である．レプリカ数 n を自然数としてランダム平均をとり，実数への解析接続をして，レプリカ極限 $(n \to 0)$ をとるわけである．この解析接続の数学的な正当性は今だに厳密に証明されていない．しかし，レプリカ法は，このレプリカ極限を代償に，ランダム変数を消去してしまったわけである．実際に計算をしてみると，あまり均一系としては研究されなかったような，変わった均一系の模型が現れるが，議論は再び均一系に戻ってきたわけである．

2.2 ランダム磁性体の臨界現象

均一系の模型になれば，これまでに培われてきた様々な手法で，特にくりこみ群による解析が可能になり，ランダム系の臨界現象は飛躍的に進む[3]．例えば，希釈磁性体の模型では，希釈の割合 x を変えたときに臨界現象のクラスが変更されるかどうかが疑問になるが，現象論的に示唆されていた Harris criterion，すなわち，「希釈する前の均一系の比熱の発散を表す指数 α が負であればクラスは希釈によって変化しないが，$\alpha > 0$ であれば変化する」という判断基準がレプリカ法を通じたくりこみ群の議論からあからさまに示された．例えば，三次元 Ising 模型の均一系の指数 α は正であることがわかっており，実際に希釈という乱れを導入することによって，新たな臨界指数のクラスが出現するというわけである[4]．このことは精力的な実験的検証も行われており，ランダム磁性体特有の普遍性クラスの存在は確定的である．

3 もっとランダム系

さて，これまではランダム磁性体といっても，均一系の拡張のような形の模型ばかり，すなわち均一系に対する乱れの効果に限定してきた．理論体系としても，レプリカ法を用いることである種の均一系に議論を持っていくことができた．しかし，乱れが本質的な役割を果して，均一系では見られない物理系もある．それがスピングラスと呼ばれるランダム磁性体である．その理論模型では，スピンの位置や磁場がランダムなのではなく，相互作用 J_{ij} が符号も含めてランダムになっている．このとき，相互作用は位置に依存して強磁性的であったり，反強磁性的であったりするので，もはやきれいにスピンの揃った秩序状態は期待できない．むしろ，各スピンは勝手に好きな方向を向いたままガラスのように固まった状態が実現しているかもしれない．実際に，相互作用の符号もランダムになるような強い乱れを持つ物質を作ることができ，スピンがガラス的に凍結していることを示唆する実験から，スピングラスの研究は始まった．

3.1 スピングラスの平均場理論

まずは，平均場理論を構成するのが相転移理論の常套手段である．平均場理論が厳密になる模型として，Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(S_i|\{J_{ij}\}) = -\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \tag{7}$$

[3]少なくとも外見上はそのように見えた

[4]最近になって，このランダム磁性体特有のクラスも均一系のクラスと同様にかなり模型の詳細 (確率分布関数等) に依らないことがわかってきた．K. Hukushima, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, (2000) 631.

である．ここで最も簡単な相互作用分布はガウス分布で，

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2\pi J^2/N} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0/N)^2}{2J^2/N}\right) \tag{8}$$

とエネルギーを示量変数とするために，平均値は J_0/N，分散は J^2/N とスケールされている．この模型もレプリカ法を用いることで，ランダム変数 J_{ij} を無くすことができ，やはり均一系に焼直すことができる．しかしながら，正しい平均場理論を構成するための道のりはそれほど簡単ではなかった．

計算の詳細はここでは省略して，結果だけを示すと，レプリカ系の分配関数は，

$$\begin{aligned} Z_n &\propto \int \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} dm_\alpha \exp\left\{-N\left(\frac{\beta^2 J^2}{2}\sum_{\langle\alpha\beta\rangle} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta J_0}{2}\sum_\alpha m_\alpha^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} n - \frac{1}{N}\log\left[\mathrm{Tr} e^{H_{\mathrm{eff}}}\right]\right)\right\} \\ & H_{\mathrm{eff}} = \beta^2 J^2 \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} q_{\alpha\beta}(\sigma_\alpha\sigma_\beta) + \beta\sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h)\sigma_\alpha \end{aligned} \tag{9}$$

ここで，σ_α はレプリカを代表するスピン変数である．この積分は鞍点評価するが，その鞍点条件から，$q_{\alpha\beta}$,m_α に対する自己無撞着条件

$$\begin{aligned} q_{\alpha\beta} &= \langle\sigma_\alpha\sigma_\beta\rangle_{\mathrm{eff}} \\ m_\alpha &= \langle\sigma_\alpha\rangle_{\mathrm{eff}} \end{aligned}$$

が出てくる．ここで，$\langle\cdots\rangle_{\mathrm{eff}}$ は有効模型 (9) での平均を表す．ここで実際に鞍点を評価したいところだが，まずレプリカ分配関数の中の有効模型はレプリカの指標 α,β の転置に関する対称性があることから，鞍点にもその対称性 (レプリカ対称性) を課してみる．すなわち，$q_{\alpha\beta} = q$, $m_\alpha = m$ と置くわけだが，その際に鞍点条件から変数 q, m はそれぞれガラス的な秩序変数，強磁性的な秩序変数，

$$q = \frac{1}{N}\overline{\langle S_i\rangle^2} \quad , \quad m = \frac{1}{N}\overline{\langle S_i\rangle} \tag{10}$$

に対応することがわかる．解析から，$J_0 \ll 1$ には低温でスピンは全体としては揃っておらず ($m = 0$)，かつランダムな方向への凍結 ($q \neq 0$) が実現しているスピングラスと呼ぶべき相がでてくることが示される．

しかしながら，このレプリカ対称鞍点解は不安定であることがわかり，また低温で負のエントロピーが出てくるなど物理的に許されない性質が導かれた．真の鞍点解を見出すことが，先に述べた困難点であった．現在一応の解決を見ている答えは，次のように段階的にレプリカ対称性を破ることによって求めることが出来る．まず，$q_{\alpha\beta}$ を $n \times n$ の行列と考える．一段階目は，$n \times n$ 行列を m_1 個の小行列に分割する．ここでそれぞれの行列要素として，異なるグループ間のレプリカ対については q_0 を，同じグループ間のレプリカ対には q_1 を割り振ることにする．第二段階目には，一段階で決めた同じグループに属する小行列を m_2 個にさらに分割し，同様に同グループに q_2 を割り振る (図 3.1)．この操作を無限回繰り返して決められる関数 $q(x)$ から安定な鞍点解が得られる．

とにかくこのルールによって得られた解は幾つかの必要条件は満たしており，また当然負のエントロピーも出てこない．このレプリカ対称性の破れた解は Parisi によって得られ，Parisi 解と呼ばれている．確かに矛盾の無い解は得られたのだが，その様子は大変特徴的である．まず，もはや秩序の記述は式 (10) のような秩序変数では表せず，レプリカ対によって値が異なる関数のようになっている．この点だけ見ても，通常の強磁性相転移の平均場理論にはなかった性質を確認することができる．し

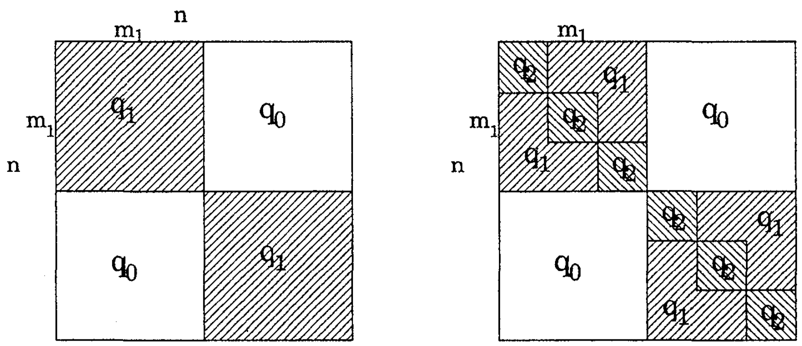

図 1: レプリカの対称性の破り方の例．左が一段階で，右は2段階目．対角成分は同じレプリカどうしの q だが，これは定義から0となる．

かも，レプリカ数 n を自然数とすれば，例えば，図3.1のような階層構造をイメージできなくもないが，計算の最後にはレプリカ極限 $(n \to 0)$ をとるわけで，秩序変数がどのように構造になっているのかがよくわからない．さらに元に戻ると，そもそもレプリカ法自体が正しい答えを出しているか，つまり正しく解析接続のとれる理論になっているかまで懐疑的になってしまう．

3.2 状態方程式の方法：できるだけランダム系のままで

さて，そうするとレプリカ法以外の方法を模索したくなる[5]．その代表例が，Thouless-Anderson-Palmer による状態方程式の方法 (TAP 理論) である．ここでは，ランダム変数に関する平均操作を後に回して，まずある相互作用を与えたときの変分自由エネルギーから各スピンの平均値 $(m_i = \langle S_i \rangle)$ を求めようとする．TAP の自由エネルギーは，

$$\begin{aligned} F_{TAP}(\{m\})/T &= -\sum_{ij} \beta J_{ij} m_i m_j - \sum_{ij} \frac{\beta^2 J_{ij}^2}{2}(1-m_i^2)(1-m_j^2) \\ &\quad - \sum_i \left(\frac{1+m_i}{2} \log \frac{1+m_i}{2} + \frac{1-m_i}{2} \log \frac{1-m_i}{2} \right) \end{aligned} \tag{11}$$

で与えられ，それぞれの項は平均エネルギー，オンサガーの反跳項，エントロピーに対応している．第2項がこの系に特有の項である．変分条件から，変分変数 m_i の満たす方程式

$$Tm_i = \tanh \left(h_i + \sum_j J_{ij} m_j - \frac{m_i}{T} \sum_j J_{ij}^2 (1 - m_j^2) \right) \tag{12}$$

が得られるが，この $\{m\}$ についての連立非線型方程式を TAP 方程式という．

この方程式を解いて得られる $\{m\}$ が各スピンの熱平衡状態を表しているので，そこから直接どんな方向に凍結しようとしているのかがわかることになる．レプリカ法に比べると実際にこの先の計算を進めることは難しい．例えば，この方程式を解くことは簡単ではない．しかし，解の個数を解析的に評価することができ，この模型に特徴的な性質がわかってきた．TAP 方程式を満たす解は実は非常に沢山 (スピン数の指数関数程度) あり，温度低下とともに分岐的に増えることが示された．つまり，強磁性相転移のように秩序状態が上向きや下向きだけではなくて，いろいろな固まり方があるというわけである．

[5] ここでの戦略は，他の方法を考え，その結果との整合性を見ようとするわけだが，解析接続性等の数学的な厳密性を追求せずに，周辺から状況を捉えようとするのは物理屋的な感覚なのか？

何かしら，意図せずして，本物のガラスのように準安定状態が沢山ある状況がこの模型で起きているような気がしてくるわけである．この解析では，ランダム変数の平均操作を施す前に，各スピンが相互作用で決まるいろいろな凍結方向があることが明らかにされた．このことは先にランダム平均をしてしまうレプリカ法ではわからなかったことであるが，この沢山の秩序状態の存在はレプリカ法の解析では単純な秩序変数 q だけでは秩序が表されなかったことに深く関連している．実は，TAP 方程式の解から統計力学を構成することで，レプリカ法の予言とより積極的な対応関係をとることができる．それは，レプリカ対称性の破れの解を構成するときに現れた異なるレプリカ対の行列要素 $\{q_{\alpha\beta}\}$ と TAP 方程式の異なる解 $\{m_i\}$ の間の重なり $Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N}\sum_i m_i^\alpha m_i^\beta$ との同一視である．ここではこの対応関係およびそこからの予言の詳細は省略するが，それらは数値計算によって検証されている．

このようにして，レプリカ法と状態方程式の方法により，スピングラスの描像は作られてきた．それはお互いに相補的であって，決して同じ答えを双方により導いたわけではなく，最後にお互いを繋ぎ合わせたのは数値計算による．それゆえに，レプリカ法の正統性あるいは他の方法による平均場理論の再構築の研究はまだ続いている．

4　平均場理論を越えて

4.1　有限次元スピングラス

Weiss 以来，相転移の描像は平均場理論で作られており，先の SK 模型はちょうど空間次元が無限大の理論に相当する．我々の住んでいるもっと低次元の世界で平均場理論の唱っている相転移描像が成り立つかどうかは気になるところである．しかも，スピングラスの場合はいろいろ眉唾なところも残っているのでなおさらである．しかしながら，現在でもまだ議論は続いており，ほとんど確定的なことは言えてはいないのが実状である．このような説明では淡白すぎるほどの生々しい激論が繰り広げられていると言った方がいいかもしれない．

また，特に3次元におけるスピングラス描像を明らかにするために，モンテカルロ法を中心とした数値計算方法が重要な役割を果たしていることも注意しておきたい．数値計算技法の中にもランダム磁性体特有の困難点があり，ここを土台として方法の発展がなされてきている．最適化手法としよく知られているシミュレーテッド・アニーリング法はスピングラス研究から派生してきたものであり，SK 模型の Kirkpatrick による発見である．

さて，レプリカ法にはレプリカ対称性の破れの可能性があることをスピングラスの平均場理論において概観したが，もう一つ前の希釈磁性体ではどうだろうか．ここはレプリカ対称解で大丈夫であろうとする風潮がある．レプリカ対称性の破れは多数の準安定状態の存在に関連して出現する一方で，希釈磁性体にはそもそも多数の準安定状態は存在しないと信じられているからである．どうやらこの理由はスピングラスの平均場描像に大きく影響を受けているように思われる．本当の答えは調べてみないとわからないのではないかと筆者は考えている．実はレプリカ対称性を仮定したくりこみ群の結果にも幾つかの物理的ではない結果が現れている．今後の課題にはなりうる問題であろう．

4.2　計算道具としてのレプリカ法

レプリカ法を計算道具として考えるならば，少なくとも，2重平均を扱う理論体系には使えそうである．このような発想は近年急速に展開を見せ，誤り訂正符号や学習理論を代表とする情報統計力学と呼ばれる分野が大きく発展している．今回の夏の学校でも田中氏が画像修復の問題について講義を

されている．

一方で，多数の準安定状態を取り扱う理論体系としての側面もまたレプリカ法は提供している．その格好の例はやはりガラスの物理であろう．ガラスはランダム系なのかと問われると少し疑問である．ガラスの模型は本来的にはランダム変数を持っておらず，(準) 安定状態がランダムなのである．どのようにランダムな凍結が出現するかを解明したい問題だが，少なくとも準安定状態を記述するためにはレプリカを使った表現が必要なのかもしれない．

参考文献

[1] 比較的最近のレビューとしてこの文献をあげる．スピングラスやランダム磁場研究の第一人者による報告書で，他にもガラスやタンパク質の問題も含まれている．： A. P. Young. edited, *"Spin Glasses and Random Fields"* (World Scientific, Singapore, 1997).

[2] 高山 一,「スピングラス」，丸善 (1991)

[3] 西森 秀稔,「スピングラス理論と情報統計力学」，岩波書店 (1999)